

(51) Int.Cl. ⁷	識別記号	F I	テーマコード (参考)
G 0 6 F 17/00		G 0 6 F 15/20	Z 4 B 0 2 4
C 1 2 N 15/09		C 1 2 N 15/00	A 5 B 0 4 9

審査請求 有 請求項の数 6 O L (全 9 頁)

(21) 出願番号 特願平10-229574
 (22) 出願日 平成10年8月14日 (1998.8.14)

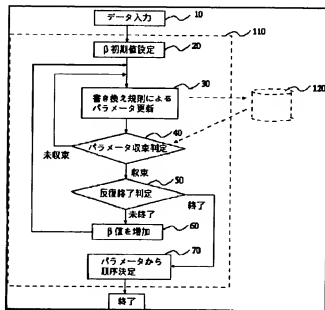
(71) 出願人 000004237
 日本電気株式会社
 東京都港区芝五丁目7番1号
 (71) 出願人 593162453
 技術研究組合新情報処理開発機構
 東京都千代田区東神田2-5-12 龍角散ビル8階
 (72) 発明者 馬見塚 拓
 東京都港区芝五丁目7番1号 日本電気株式会社内
 (74) 代理人 100071272
 弁理士 後藤 洋介 (外1名)
 Fターム (参考) 4B024 AA20 CA09 HA19 HA20
 5B049 EE03 EE31 EE41

(54) 【発明の名称】 組合せ最適化方法および組合せ最適化システム

(57) 【要約】

【課題】 複数地点（マーカー或いはプロップ）のすべての各二地点間の距離を所与のデータとし、距離和が最短となる地点の順序を決める組合せ最適化方法を提供する。

【解決手段】 本発明による組合せ最適化方法は、前記順序の各順番において、どの地点を通るかを与える確率分布を持つ確率モデルを使用し、確率的な探索を使用せずに、与えられたデータから最適な確率分布を推定する際に大域的最適解を得るステップを有することを特徴とする。



【特許請求の範囲】

【請求項 1】 複数地点のすべての各 2 地点間の距離を所与のデータとし、距離和が最短となる地点の順序を決める組合せ最適化方法において、

前記順序の各順番において、どの地点を通るかを与える確率分布を持つ確率モデルを使用し、確率的な探索を使用せずに、与えられたデータから最適な確率分布を推定する際に大域的最適解を得るステップを有することを特徴とする組合せ最適化方法。

【請求項 2】 複数地点のすべての各 2 地点間の距離を所与のデータとし、距離和が最短となる地点の順序を決める組合せ最適化システムにおいて、

前記順序の各順番において、どの地点を通るかを与える確率分布を持つ確率モデルを使用し、確率的な探索を使用せずに、与えられたデータから最適な確率分布を推定する際に大域的最適解を得る手段を有することを特徴とする組合せ最適化システム。

【請求項 3】 遺伝子地図を作成するために実験により得られた、複数のマーカーのすべての対のハミング距離を所与のデータとし、最短距離となるマーカーの順序を決める組合せ最適化方法において、

前記順序の各順番において、どのマーカーがあるかを与える確率分布を持つ確率モデルを使用し、確率的な探索を使用せずに、与えられたデータから最適な確率分布を推定する際に大域的最適解を得るステップを有すること

特徴とする組合せ最適化方法。

【請求項 4】 遺伝子地図を作成するために実験により得られた、複数のマーカーのすべての対のハミング距離を所与のデータとし、最短距離となるマーカーの順序を決める組合せ最適化システムにおいて、

前記順序の各順番において、どのマーカーがあるかを与える確率分布を持つ確率モデルを使用し、確率的な探索を使用せずに、与えられたデータから最適な確率分布を推定する際に大域的最適解を得る手段を有することを特徴とする組合せ最適化システム。

【請求項 5】 遺伝子地図を作成するために実験により得られた、複数のプローブのすべての対のハミング距離を所与のデータとし、最短距離となるプローブの順序を決める組合せ最適化方法において、

前記順序の各順番において、どのプローブがあるかを与える確率分布を持つ確率モデルを使用し、確率的な探索を使用せずに、与えられたデータから最適な確率分布を推定する際に大域的最適解を得るステップを有すること

特徴とする組合せ最適化方法。

【請求項 6】 遺伝子地図を作成するために実験により得られた、複数のプローブのすべての対のハミング距離を所与のデータとし、最短距離となるプローブの順序を決める組合せ最適化システムにおいて、

前記順序の各順番において、どのプローブがあるかを与える確率分布を持つ確率モデルを使用し、確率的な探索

を使用せずに、与えられたデータから最適な確率分布を推定する際に大域的最適解を得る手段を有することを特徴とする組合せ最適化システム。

【発明の詳細な説明】

【0001】

【発明の属する技術分野】本発明は、複数地点の各 2 地点間の距離を所与のデータとし、各地点を一回のみ通過しながら、全地点を最短距離で経由する道（地点の順序）を求めるという組合せ最適化問題を解決する方法およびそれを実行するシステムに関し、特に、遺伝子地図を作成する際に、複数のプローブ（あるいはマーカー）間の各対間の距離のデータから、距離和が最小なプローブの順序（オーダー）を決定する方法およびシステムに関する。

【0002】

【従来の技術】複数の地点とその中の 2 地点間の距離がすべて与えられた際に、各地点を一回のみ通過しながら、全地点を最短距離で経由する道（地点の順序）を求める問題は、巡回セールスマン問題（以下、TSP）と呼ばれる。n 個の地点があった場合に、各地点を一回のみ通過し全地点を通過するという条件を満たす道は、 $(n!)/2$ 個の組合せがある。すなわち、TSP はこれらの組合せの中から最適解を探索する組合せ最適化問題の一つである。

【0003】組合せ最適化問題では、すべての組合せの数は指数関数で増大するため、従来の解法は、現実時間内では、いずれも準最適解が得られることのみしか保証しない。その中で、初期値にかかわらず大域的な最適解を得る可能性が高い手法は、シミュレーテッドアニーリングをはじめとした確率的探索手法である。シミュレーテッドアニーリングは、1983 年発行の米国の雑誌「サイエンス (Science)」の 220 号 671-680 頁記載の Kirkpatrick (Kirkpatrick) らによる論文「Optimization by Simulated Annealing」(Optimization by Simulated Annealing) において提案された。

【0004】シミュレーテッドアニーリングでは、確率的な探索アルゴリズムを使用することにより、初期値によらない大域的な最適解の探索を可能にしている。さらに、確率的な遷移の起きやすさに比例した温度パラメータを目的関数に対して導入し、探索効率の向上を狙っている。すなわち、温度パラメータが大きくなるとは、探索の際の確率的な遷移が頻発し、一方、温度パラメータが低下するにつれ確率的な遷移は減少し、適当な解へと収束する。

【0005】このように、シミュレーテッドアニーリングは初期値にかかわらず大域的な最適解の探索を可能にするという長所を持っている。この長所を持ち得る、同様の確率的な探索を行う手法として、マルコフチェーンモンテカルロが挙げられる。しかしながら、いずれの手

法も確率的な探索を行うため、同一の初期値を用いても得られる解が一定しないという問題点がある。また、確率的な探索のため、一般には、計算時間がかかるという問題点も挙げられる。

【0006】さらに、シミュレーテッドアニーリングでは、確率的な探索とともに温度パラメータを低下させるため、温度パラメータのスケジューリングが難しいとされている。

【0007】これらの欠点を補うため、確率的な探索を行わずに大域的最適解を求めることが可能な決定的アニーリングと呼ばれる手法がある。決定的アニーリングでは、シミュレーテッドアニーリングと同様に温度パラメータを導入し、目的関数の代わりに温度パラメータに依存する関数を考慮する。この関数は、温度が高い時は目的関数の大まかな構造を表し、温度が十分に低い時に目的関数に一致する。したがって、決定的アニーリングでは、温度パラメータの各値で考慮すべき関数の最小(極小)値を決定的アルゴリズムにより求めて行く。これにより、確率的なアルゴリズムを使用することなく、大域的最適解を高い確率で求めることが可能になる。

【0008】決定的アニーリングは、1993年発行の米国の雑誌「アイトリブルイ トランザクションズ オン パターン アナリシス アンド マシン イン テリジェンス」(IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence)の15号785-794頁記載のローズ(Rose)らによる論文「コンストレイント クラスタリング アズ アン オプティマイゼーション メソッド」(Constrained Clustering as an Optimization Method)において、複数の地点の座標が与えられた場合にそれら地点を一回ずつ通りながら最短で経由する道を探るジオメトリックTSPと呼ばれる問題に対して適用されている。

【0009】しかしながら、ジオメトリックTSPではなく、より一般的な、複数の地点のすべての各二地点間の距離がデータとして与えられた場合のTSPに対する決定的アニーリングによる解法およびそれを実現するシステムは、まだ存在しない。

【0010】一方、近年のいわゆるゲノムプロジェクトの進展により、大量の遺伝子配列が同定されて来ている。遺伝子は4種類の塩基からなり、いわば4種類の文字からなる文字列であるが、遺伝子配列の同定においては、遺伝子の文字列を決定する前に、まず、プローブやマーカと呼ばれる特徴的な配列が遺伝子のどこにあるか(遺伝子のどこにどのようなプローブ(やマーカ)があるかを記したものを遺伝子(染色体)地図と呼ぶ)を決定する。すなわち、遺伝子地図を、まず作成し、その中で重要と思われる配列から文字列を順次決定する。

【0011】遺伝子地図の作成は二段階の手順からなり、まず分子生物学的な実験を行い、次に実験データを処理する。最初の段階で使用される実験手法は複数存在

し、それら各々の実験手法に応じて得られるデータは異なっている。

【0012】しかしながら、処理すべき実験データの形式はほぼ同一であり、次の段階での処理手法が、いずれの実験データに対しても適用可能である。

【0013】そこで、ここでは、最初の段階の実験手法としてラジエーションハイブリッドマッピング(以下、RHマッピング)を使用した場合について説明する。RHマッピングは、1990年発行の米国の雑誌「サイエンス(Science)」の250号245-250頁記載のックス(Cox)らによる論文「ラジエーション ハイブリッド マッピング:アソマティック セル ジェネティック メソッド フォー コンストラクティング ハイブリュレーション マップス オブ マンマリアン クロモソーム」(Radiation Hybrid Mapping: A Somatic Cell Genetic Method for Constructing High-Resolution Maps of Mammalian Chromosomes)において提案された。RHマッピングは、この提案以降、非常に頻繁に使用されている。

【0014】この方法では、 γ 線を発射することにより遺伝子をランダムに壊し、壊れた遺伝子の破片を分子生物学的な操作によりランダムに取り出し、破片にどのようなマーカ(短い配列)が残っているかを検出する。一回の実験により、いくつかのマーカが検出されるので、検出されたマーカを1、検出されないマーカを0とすれば、実験とマーカを行と列とし、1または0の要素からなる行列が実験データとして得られる。 γ 線の遺伝子への放射はランダムに行われ、マーカ間の距離が近いものほど破片に残りやすいので、実験データの行列において、列間の要素がなるべく一致している列ほど、そのマーカ間の距離が近いことになる。すなわち、列の要素の違い(変化)がマーカ間の距離に対応している。

【0015】さて、遺伝子地図作成の第二段階は、RHマッピングの実験データから、各マーカ間の距離(列の要素の違い(より具体的には、与えられた行列の列間のハミング距離))を算出し、さらに、各マーカ間の距離の和が最小になるようにマーカの順序(以下、オーダーと呼ぶ)を決定し、得られたオーダーと各マーカ間の距離から遺伝子地図を作成することに相当する。

【0016】特に、列間のハミング距離が計算されたとして、それから、各マーカを一回ずつ考慮したマーカのオーダーの中で、最もマーカ間の距離が小さくなる順序を求める部分は最も重要な問題である。

【0017】この問題は、RHマッピング以外の実験手法を用いた場合にも、共通に存在する。例えば、遺伝子を制限酵素を用いることによりクローンと呼ばれる断片に切断し、各クローンにどのようなプローブ(短い配列)が検出されたかを調べる手法がある。この手法で得

られる実験データは、行をクローン、列をプローブとした行列であり、実験データよりプローブのオーダーを決定することがデータ処理の目的となる。従って、R-Hマッピングの場合と同様に、列間のハミング距離を計算し、距離和が最小となるようなプローブのオーダーを決定すれば良い。

【0018】さて、列間のハミング距離が計算されたとして、それらから、距離和が最小になるようにマーカーのオーダーを決定する問題は、オーダーにはマーカーを一回ずつしか使わないので、マーカーをTSPにおける地点とし、マーカー間のハミング距離を地点間の距離とみなせば、TSPという一般的な組合せ最適化問題に相当する。

【0019】そのため、遺伝子地図作成の際にマーカーのオーダーを決定するという問題に対しても、組合せ最適化手法が使用されており、大域的最適解を求めるために、前述のシミュレーテッドアニーリングやマルコフチェーンモンテカルロが使用されている。例えば、1994年発行の英国の雑誌「ゲノミクス」(Genomics)の22号482-486頁記載のモット(Mott)らによる論文「アン アルゴリズムツウ ディテクト キメリック クローンズ アンド ランダム ノイズ イングノミック マッピング」(An Algorithm to Detect Chimeric Clones and Random Noise in Genomic Mapping)や1993年発行の英国の雑誌「コンピュータ アプリケーションズ イン ザ バイオサイエンス」(Computer Applications in the Biosciences)の9号215-219頁記載のアーノルド(Arnold)らによる論文「オーディエス：オーダーリング ディエヌエイ シークエンスサイズ ア フィジカル マッピング アルゴリズム ベースド オン シミュレーテッド アニーリング」(ODS:Ordering DNA Sequences - a Physical Mapping Algorithm Based on Simulated Annealing)などにおいてシミュレーテッドアニーリングが使用されている。また、1997年発行の米国の雑誌「ジャーナル オブ コンピュータショナル バイオロジー」(Journal of Computational Biology)の4号505-516頁記載のヒース(Heath)らによる論文「マルコフ チェイン モンテ カルロ メソーズ フォー ラジエーション ハイブリッド マッピング」(Markov Chain Monte Carlo Methods for Radiation Hybrid Mapping)においてマルコフチェーンモンテカルロ法が使用されている。

【0020】しかし、前述のように、いずれの手法も確率的な探索を行うため、初期値から得られる解に再現性が必ずしもなく、また、計算時間がかかるという問題点がある。

【0021】一方、確率的な探索を行わず大域的最適解を求める手法として、例えば、前述の決定的アニーリングがある。しかし、前述のように、決定的アニーリングはジオメトリックTSPにのみ適用されており、一般的

な各二地点間の距離のデータが与えられるTSPを決定的アニーリングにより解く方法およびそのシステムは存在しない。

【0022】

【発明が解決しようとする課題】上述したように、遺伝子地図の作成の際に、マーカー（プローブ）の順序付けを組合せ最適化問題として解く必要がある。さらに、現在、この組合せ最適化問題を解くために、大域的最適解を探索可能なアルゴリズムを使用する場合には、シミュレーテッドアニーリングやマルコフチェーンモンテカルロが使用されている。しかしながら、前述のように、いずれの手法も確率的な探索アルゴリズムであるため、一定の初期値から得られる解に再現性がなく、また、計算時間がかかるという問題点があった。

【0023】特に、マルコフチェーンモンテカルロを用いた手法では、マーカーの順序それぞれに確率を与えるが、順序は、マーカーの数に対して指数オーダーで増えるため、現実時間で扱うことが可能なマーカーの数は極端に限られる。

【0024】また、シミュレーテッドアニーリングによる手法においても、前述のように必要とする計算時間の大きさを扱うマーカー数に制限があった。

【0025】一方、例えばこの問題を、確率的な探索を使用せず、計算効率が比較的良好、前述の決定的アニーリングより解くとしても、ジオメトリックTSPに対する解法が少なく、一般的なTSPに対する解法は存在しない。

【0026】従って、この問題に対して、扱うことが可能なマーカーの数に制限がなく、また、確率的アルゴリズムを使用せず、比較的短い計算時間で大域的最適解を求めることが可能な手法およびシステムが強く求められていた。

【0027】従って本発明の課題は、複数地点のすべての各二地点間の距離を所与のデータとし、各地点を一回のみ通過しながら、全地点を最短距離で経由する道（地点の順序）を求めるという組合せ最適化問題に対し、確率的探索手法を使用せずに、短時間でかつ高精度に問題を解決する方法およびそれを実行するシステムを提供することにある。

【0028】

【課題を解決するための手段】本発明の第1の態様によれば、複数地点のすべての各二地点間の距離を所与のデータとし、距離和が最短となる地点の順序を決める組合せ最適化方法において、前記順序の各順番において、どの地点を通るかを与える確率分布を持つ確率モデルを使用し、確率的な探索を使用せずに、与えられたデータから最適な確率分布を推定する際に大域的最適解を得るステップを有することを特徴とする組合せ最適化方法が得られる。

【0029】本発明の第2の態様によれば、複数地点の

すべての各二地点間の距離を所与のデータとし、距離和が最短となる地点の順序を決める組合せ最適化システムにおいて、前記順序の各順番において、どの地点を通るかを与える確率分布を持つ確率モデルを使用し、確率的な探索を使用せずに、与えられたデータから最適な確率分布を推定する際に大域的最適解を得る手段を有することを特徴とする組合せ最適化システムが得られる。

【0030】本発明の第3の態様によれば、遺伝子地図を作成するために実験により得られた、複数のマーカーのすべての対のハミング距離を所与のデータとし、最短距離となるマーカーの順序を決める組合せ最適化方法において、前記順序の各順番において、どのマーカーがあるかを与える確率分布を持つ確率モデルを使用し、確率的な探索を使用せずに、与えられたデータから最適な確率分布を推定する際に大域的最適解を得るステップを有することを特徴とする組合せ最適化方法が得られる。

【0031】本発明の第4の態様によれば、遺伝子地図を作成するために実験により得られた、複数のマーカーのすべての対のハミング距離を所与のデータとし、最短距離となるマーカーの順序を決める組合せ最適化システムにおいて、前記順序の各順番において、どのマーカーがあるかを与える確率分布を持つ確率モデルを使用し、確率的な探索を使用せずに、与えられたデータから最適な確率分布を推定する際に大域的最適解を得る手段を有することを特徴とする組合せ最適化システムが得られる。

【0032】本発明の第5の態様によれば、遺伝子地図を作成するために実験により得られた、複数のプローブのすべての対のハミング距離を所与のデータとし、最短距離となるプローブの順序を決める組合せ最適化方法において、前記順序の各順番において、どのプローブがあるかを与える確率分布を持つ確率モデルを使用し、確率的な探索を使用せずに、与えられたデータから最適な確率分布を推定する際に大域的最適解を得るステップを有することを特徴とする組合せ最適化方法が得られる。

【0033】本発明の第6の態様によれば、遺伝子地図を作成するために実験により得られた、複数のプローブのすべての対のハミング距離を所与のデータとし、最短距離となるプローブの順序を決める組合せ最適化システムにおいて、前記順序の各順番において、どのプローブがあるかを与える確率分布を持つ確率モデルを使用し、*

$$P_{\theta}(x, \pi) = e^{-\lambda \sum_i d_{i, \pi(i)}, m(i+1)} \prod_i P_{i, \pi(i)} \quad (3)$$

求めたいオーダーは、最適なパラメータ θ が与えられた場合に (2) 式を最大とするオーダー π である。そこで、最適なパラメータ θ を得るために、(4) 式を最大とするパラメータ θ を求める。

$$【0042】 \Sigma_i P_{i, \pi}(x, \pi) \quad (4)$$

より正確には、(4) 式の対数の期待値を最大にするパ

* 確率的な探索を使用せずに、与えられたデータから最適な確率分布を推定する際に大域的最適解を得る手段を有することを特徴とする組合せ最適化システムが得られる。

【0034】

【発明の実施の形態】次に本発明の実施例について説明する。

【0035】本発明は、マーカー（地点）の順序を決定する組合せ最適化部（後に図示）と確率パラメータを保持するパラメータ格納部（後に図示）とからなる。

【0036】上記組合せ最適化部は、複数地点のすべての各二地点間の距離を所与のデータとし、距離和が最短となる地点の順序を決める組合せ最適化を行うために、順序の各順番において、どの地点を通るかを与える確率分布を持つ確率モデルを使用し、確率的な探索を使用せずに、与えられたデータから最適な確率分布を推定する際に大域的最適解を得るものである。

【0037】上記パラメータ格納部は、推定される確率パラメータを格納しておき、組合せ最適化部においてパラメータ書き換えの際に、使用されるものである。

【0038】次に、本発明の実施例（アルゴリズム）について説明する。

【0039】最初に、本説明で使用する記号について説明する。TSPにおける地点すなわちマーカーの数を n 、マーカーの各々を $1, \dots, n$ とする。マーカー i とマーカー k との間のハミング距離を $d_{i,k}$ 、 i 番目に通過する地点（マーカー）がマーカー k である確率を $p_{i,k}$ とする。ここで、各順番にはいずれかのマーカーが来るので次式が成り立っている。

$$【0040】 \sum_j p_{i,j} = 1 \quad (1)$$

ここで、簡単のために、データ $d_{i,j}$ ($i=1, \dots, n, j=1, \dots, n, i \neq j$) を x と書き、パラメータ $p_{i,j}$ ($i=1, \dots, n, j=1, \dots, n$) を θ と書く。あるオーダー π に与えられる確率を、 $P_{\theta}(x, \pi)$ (2)

と書き、オーダーの i 番目のマーカー $\pi(i)$ とすると、 $P_{\theta}(x, \pi)$ は、下記の数式1で示される (3) 式で計算されるものとする。

$$【0041】$$

【数1】

ラメータ θ を求めることを考える。この場合、(4) 式を最大とするパラメータ θ を求めていることになる。ただし、すべてのマーカー（地点）を一回のみづつ使うため、パラメータには制約がつくことに注意する。

【0043】以下、(4) 式を最大とするパラメータ θ を求めるためのアルゴリズムについて説明する。

【0044】まず、局所的最適解が求まることが保証されるアルゴリズムを説明する。

【0045】最初に、 $P_i(x, \pi)$ を求めるために前向き確率 $A_{i,j}$ を導入する。 i ($1 < i$) 個の地点を通過する際に、通過オーダーは当然ながら複数存在する。言い換えれば、 i 個のマーカーを順序付けるとオーダーは複数存在する。前向き確率 $A_{i,j}$ は、 $(i-1)$ 個のマーカーが既に順序付けられていて、さらに i 番目にマーカー j が来る予定の確率である。ここで前向き確率を計算する際の順序付けの条件は、同じマーカーが連続しないこととする。

$$A_{i,j} = \sum_{k(i \neq j)} e^{-\lambda_{i,j} d_{i,j}} P_{i-1,k} A_{i-1,k} \quad (i = 2, \dots, n, j = 1, \dots, n) \quad (6)$$

すると、 $P_i(x, \pi)$ は、下記の数式 3 で示される (7) 式より計算可能である。

$$\sum_{\pi} B_0(x, \pi) = \sum_k A_{n,k} \quad (7)$$

また、前向き確率と同様に後向き確率 $B_{i,j}$ を考えることが可能である。後向き確率 $B_{i,j}$ は、前向き確率と全く反対に、順序付けの際の $(i+1)$ 番目から n 番目までの $(n-i)$ 個のマーカーが既に順序付けられていて、さらに i 番目にマーカー j が来る予定の確率である。前向き確率と同様に、後向き確率を計算する際の条件は、同じマーカーが連続しないこととする。

【0051】後向き確率も前向き確率と同様、動的計画法により以下の順序で計算する。

$$B_{i,j} = \sum_{k(i \neq j)} e^{-\lambda_{i,j} d_{i,j}} P_{i+1,k} B_{i+1,k} \quad (i = 2, \dots, n, j = 1, \dots, n) \quad (9)$$

やはり同じく前向き確率と同様に、 $P_i(x, \pi)$ は、下記の数式 5 で示される (10) 式より計算可能である。

$$\sum_{\pi} B_0(x, \pi) = \sum_k B_{n,k} \quad (10)$$

ここで、 $A_{i,j}$ 、 $B_{i,j}$ から、 $\gamma_{i,j}$ を (11) 式で定義する。

【0056】

$$\gamma_{i,j} = A_{i,j} P_{i,j} B_{i,j} \quad (11)$$

さて、(3) 式を最大とするためには、下記の数式 6 で

$$F = -\log \sum_{\pi} B_0(x, \pi) \quad (12)$$

さらに、各マーカーを一回ずつすべて使用するという制約をみたすために、例えば、下記の数式 7 で示される (13) 式の制約を加えた下記の数式 8 で示される (1

$$\sum_i \sum_{j(i>1)} \sum_k P_{i,k} P_{j,k} \quad (13)$$

【0059】

$$-\log \sum_{\pi} B_0(x, \pi) + \lambda_2 \sum_i \sum_{j(i>1)} \sum_k P_{i,k} P_{j,k} \quad (14)$$

局所最適化の場合、(14) 式を最小にするパラメータの書き換え規則は、例えば、下記の数式 9 にて示される

* 【0046】前向き確率は動的計画法により、以下のよう

に計算する。

【0047】まず、初期条件として (5) 式を計算する。

$$A_{1,j} = 1 \quad (j = 1, \dots, n) \quad (5)$$

次に、 i と j を順次大きくしながら、下記の数式 2 で示

される (6) 式を計算する。

【0049】

【数 2】

※ 【0050】

【数 3】

★ 【0052】まず、初期条件として (8) 式を計算する。

20 【0053】

$$B_{1,j} = 1 \quad (j = 1, \dots, n) \quad (8)$$

次に、 i と j を順次大きくしながら、下記の数式 4 で示される (9) 式を計算する。

【0054】

【数 4】

☆ 【0055】

【数 5】

◆ 示される (12) 式で定義する目的関数を最小にすればよい。

【0057】

【数 6】

(4) 式を最小にする。

【0058】

【数 7】

【数 8】

(15) 式のように書ける。 $\Delta v_{i,j}$ は、パラメータ $v_{i,j}$ の変化量を表している。

【0060】

【数9】

$$\Delta u_{i,j} = A \left\{ \frac{\gamma_{i,j}}{\sum_j \gamma_{i,j}} - p_{i,j} - \lambda_2 \left(\alpha_{i,j} + p_{i,j} \sum_j \alpha_{i,j} \right) \right\} \quad (15)$$

ただし、(15)式において、 $p_{i,j}$ 及び $\alpha_{i,j}$ は、下記の数式10及び下記の数式11にて示される(16)式及び(17)式でそれぞれ示されるものである。

* 【0061】

【数10】

$$p_{i,j} = \frac{e^{\lambda_3 u_{i,j}}}{\sum_j e^{\lambda_3 u_{i,j}}} \quad (16)$$

【0062】

【数11】

$$\alpha_{i,j} = p_{i,j} \sum_{k=1} p_{k,j} \quad (17)$$

さらに、(15)式において、 A は λ_2 に比例する定数である。

※12にて示される(18)式が考えられる。

【0064】

【0063】他にも、書き換え規則として、下記の数式※

【数12】

$$\Delta u_{i,j} = A \left(\frac{\gamma_{i,j}}{\sum_j \gamma_{i,j}} - \frac{\alpha_{i,j}}{\sum_j \alpha_{i,j}} \right) \quad (18)$$

次に、上記アルゴリズムを発展させ、大域的最適化を探索するためのアルゴリズムについて説明する。

★タの逆数にあたる β が導入された(19)式を最小にする。

【0065】大域的最適化を行う場合には、(14)式の代わりに、下記の数式13にて示され、温度パラメータ★

【0066】

【数13】

$$-\frac{1}{\beta} \log \sum_{\pi} p_0(x, \pi)^{\beta} + \lambda_2 \sum_i \sum_{j>i} \sum_k p_{i,k} p_{j,k} \quad (19)$$

このために、まず、前向き確率と後向き確率を變形する。變形した前向き確率 $A^{\wedge}_{i,j}$ は、初期条件として(20)式を計算する。

☆さらに、動的計画法により、 i, j を順次大きくしながら、下記の数式14にて示される(21)式を計算する。

【0067】

30

【0068】

 $A^{\wedge}_{i,j} = 1^{\wedge} \quad (j = 1, \dots, n)$

(20)

☆

【数14】

$$A^{\wedge}_{i,j} = \sum_{k(i \neq j)} e^{-\beta \lambda_1 d_{k,j}} p^{\beta}_{i-1,k} A^{\wedge}_{i-1,k} \quad (i = 2, \dots, n, j = 1, \dots, n) \quad (21)$$

次に、後向き確率 $B^{\wedge}_{i,j}$ は、初期条件として(22)式を計算する。

◆ら、下記の数式15にて示される(23)式を計算する。

【0069】

【0070】

 $B^{\wedge}_{i,j} = 1^{\wedge} \quad (j = 1, \dots, n)$

(22)

【数15】

さらに、動的計画法により、 i, j を順次大きくしながら◆

$$B^{\wedge}_{i,j} = \sum_{k(i \neq j)} e^{-\beta \lambda_1 d_{i,k}} p^{\beta}_{i+1,k} B^{\wedge}_{i+1,k} \quad (i = 2, \dots, n, j = 1, \dots, n) \quad (23)$$

(20)式を最小にするパラメータの書き換え規則は、例えば、下記の数式16にて示される(24)式のように与えられる。局所最適化の場合と同様に、 Δv

 $v_{i,j}$ は、パラメータ $v_{i,j}$ の变化量を表している。

【0071】

【数16】

$$\Delta v_{i,j} = A \left\{ \frac{\gamma_{i,j}}{\sum_j \gamma_{i,j}} - p_{i,j} - \lambda_2 \left(\alpha_{i,j} + p_{i,j} \sum_j \alpha_{i,j} \right) \right\} \quad (24)$$

ただし、(24)式において、 $\gamma^{\wedge}_{i,j}$ は、下記の数式17にて示される(25)式で示される。

【0072】

【数17】

$$\gamma_{i,j} = A_{i,j}^{\beta} P_{i,j}^{\beta} B_{i,j}^{\beta}$$

その他のパラメータの書き換え規則として、下記の数式
18にて示される(26)式も考えられる。

$$\Delta u_{i,j} = \lambda \left(\frac{\gamma_{i,j}}{\sum_j \gamma_{i,j}} - \frac{a_{i,j}}{\sum_j a_{i,j}} \right) \quad (26)$$

大域的最適化を行う場合には、書き換え規則に出現する
 β を制御する必要がある。すなわち、 β を、正でありな
がら十分小さい初期値から徐々に増加させる。各 β にお
いて、パラメータの値が収束するまで(26)式の書き
換え規則を適用して、パラメータを書き換える。 β を増
加させてもパラメータの収束値が変化しなければ、反復
アルゴリズム全体を終了させる。

【0074】最後に、得られた確率パラメータ $p_{i,j}$
($i=1, \dots, n, j=1, \dots, n$) からマーカー
(地点)の順序(オーダー)を得るには、各順番におい
て、たとえば、 i 番目の順番においては、最も大きな確
率 $p_{i,j}$ を与える k が、その順番に来るマーカーとな
る。

【0075】次に、図1を参照して、これまで説明して
きた本発明のアルゴリズムの流れ図で説明しつつ、本ア
ルゴリズムを実施するシステム構成を説明する。

【0076】図1はアルゴリズムの流れを示しており、
破線で本システムの構成要素を示している。

【0077】本システムは、マーカー(地点)の順序を
決定する組合せ最適化部110と、確率パラメータを保
持するパラメータ格納部120とを有する。

【0078】最初に、入力としてデータ入力部10よ
り、地点間の距離がデータとして組合せ最適化部110
の初期値設定部20に入力される。

【0079】次に、 β によるループに入る。このループ
では、 β 初期値設定部20から、 β の値を少しずつ増大
させる。 β によるループの中では、書き換え規則による
確率パラメータの更新部30が、パラメータ収束判定部
40により収束したと判定されるまで続けられる。

【0080】また、 β によるループの最後には、このル
ープの終了を判定する部分である反復終了判定部50が
あり、これにより未終了と判定された場合は、 β 値更新
部60にて β 値を増加させ、 β ループ内のパラメータ更
※40

*【0073】
【数18】

※新を再度行う。

【0081】反復終了判定部分50により終了と判定さ
れた場合は、これまでに更新されたパラメータを使用し
て、マーカー(地点)の順序を順序決定部70において
決定し、結果を出力する。

【0082】

【発明の効果】複数地点の各二地点間の距離のデータか
ら各地点を一回のみ通過しながら全地点を最短距離で経
由する順序を求める問題は、従来、確率的な探索を使用
しない決定的アニーリングでは大域的最適解の探索が不
可能であった。しかし、上述した本発明によれば、この
問題を決定的アニーリングにより解決する方法とシステ
ムが実現可能になる。さらに、これまで確率的な探索手
法では、実施不可能であった以下の2点の特徴を本発明
は実現している。

【0083】1 計算効率性

2 同一の初期値が与えられた場合の試行の再現性
これらを可能にした本発明により、既存手法に較べて、
効率的に、かつ、高い精度で組合せ最適化問題を解決す
る方法およびシステムが実現可能である。

【図面の簡単な説明】

【図1】本発明の一実施例の動作を説明するための流れ
図である。

【符号の説明】

110 組合せ最適化部
120 パラメータ格納部
10 データ入力部
20 β 初期値設定部
30 パラメータ更新部
40 パラメータ収束判定部
50 反復終了判定部
60 β 値更新部
70 順序決定部

【図 1】

